Matematické modely chemickotechnologických systémov

Prietokový chemický reaktor s miešaním

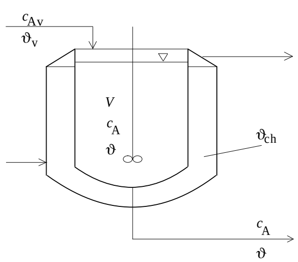
M. Bakošová a M. Fikar

Oddelenie informatizácie a riadenia procesov
Ústav informatizácie, automatizácie a matematiky
FCHPT STU v Bratislave

LS 2006/2007

Obsah

Schéma



ϑ_v, ϑ, ϑ_{CH} [K]
c_{Av}, c_A [mol.m^{-3}]
V [m^3]
q [m^{3}s^{-1}]
ρ [kg.m^{-3}]
c_p [J.kg^{-1}.K^{-1}]
F [m^2]
α [W.m^{-2}.K^{-1}]

Reakcia

Reakcia 1. poriadku: $A \xrightarrow{k} B$
stechiometrické koeficienty: $\nu_A = -1$, $\nu_B = 1$
reakčná objemová rýchlosť reakcie:
$\dot{\xi}_V(t) = k(t)c_A(t) = k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta(t)}} c_A(t)$
$\dot{\xi}_V$ [mol.m^{-3}.s^{-1}]
k [s^{-1}], k_0 [s^{-1}]
E_a [J.mol^{-1}], R [J.mol^{-1}.K^{-1}]
Reakcia exotermická $\Rightarrow$ reakčná entalpia: $(\Delta_r H) < 0$
$(\Delta_r H)$ [J.mol^{-1}]

Materiálová bilancia zložky A

(súčet vstupujúcich mólových tokov zložky A) + (rýchlosť tvorby zložky A chemickou reakciou)= (súčet vystupujúcich mólových tokov zložky A) + (rýchlosť akumulácie látkového množstva zložky A v systéme)

$$
\begin{aligned}
qc_{Av}(t) + r_A(t)V &= qc_A(t) + \frac{\mathrm{d}\left[Vc_A(t)\right]}{\mathrm{d}t} \\
qc_{Av}(t) + \nu_A \dot{\xi}_V(t)V &= qc_A(t) + V\frac{\mathrm{d}c_A(t)}{\mathrm{d}t} \\
qc_{Av}(t) - k(t)c_A(t)V &= qc_A(t) + V\frac{\mathrm{d}c_A(t)}{\mathrm{d}t}
\end{aligned}
$$

Entalpická bilancia reakčnej zmesi

(súčet vstupujúcich tepelných tokov)+ (rýchlosť tvorby tepla chemickou reakciou) = (súčet vystupujúcich tepelných tokov) + (rýchlosť akumulácie tepla v systéme)

$$
\begin{aligned}
q\rho c_p\vartheta_v(t) + \dot{\xi}_V(t)V(-\Delta_r H) &= q\rho c_p\vartheta(t) + \alpha F\left[\vartheta(t) - \vartheta_{CH}(t)\right] \\
&+ \frac{\mathrm{d}\left[V\rho c_p\vartheta(t)\right]}{\mathrm{d}t} \\
q\rho c_p\vartheta_v(t) + k(t)c_A(t)V(-\Delta_r H) &= q\rho c_p\vartheta(t) + \alpha F\left[\vartheta(t) - \vartheta_{CH}(t)\right] \\
&+ V\rho c_p\frac{\mathrm{d}\vartheta(t)}{\mathrm{d}t}
\end{aligned}
$$

Nelineárny dynamický matematický model

Nelineárny dynamický matematický model so vstupnými veličinami na pravej strane

$$
\begin{aligned}
V\frac{\mathrm{d}c_A(t)}{\mathrm{d}t} &+ qc_A(t) + k(t)c_A(t)V = qc_{Av}(t) \\
V\rho c_p\frac{\mathrm{d}\vartheta(t)}{\mathrm{d}t} &+ \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta(t) + k(t)c_A(t)V(\Delta_r H) \\
&= q\rho c_p\vartheta_v(t) + \alpha F\vartheta_{CH}(t)
\end{aligned}
$$

Začiatočné podmienky

$$
\begin{aligned}
c_A(0) = c_{A0} = c_A^s \\
\vartheta(0) = \vartheta_0 = \vartheta^s
\end{aligned}
$$

Nelineárny dynamický matematický model

Veličiny v modeli reaktora:
stavové veličiny $c_A(t), \vartheta(t)$
vstupné veličiny $c_{Av}(t), \vartheta_v(t)$, $\vartheta_{CH}(t)$
výstupné veličiny $c_A(t), \vartheta(t)$

Matematický model rovnovážneho stavu (MMRS)

$$\begin{aligned} V\frac{\mathrm{d}c_A^s}{\mathrm{d}t} &+ qc_A^s + k^s c_A^s V = qc_{Av}^s \\ V\rho c_p \frac{\mathrm{d}\vartheta^s}{\mathrm{d}t} &+ \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta^s + k^s c_A^s V(\Delta_r H) \\ &= q\rho c_p \vartheta_v^s + \alpha F \vartheta_{CH}^s \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} qc_A^s + k^s c_A^s V &= qc_{Av}^s \\ \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta^s + k^s c_A^s V(\Delta_r H) &= q\rho c_p \vartheta_v^s + \alpha F \vartheta_{CH}^s \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} qc_A^s + k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta^s}} c_A^s V &= qc_{Av}^s \\ \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta^s + k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta^s}} c_A^s V(\Delta_r H) &= q\rho c_p \vartheta_v^s + \alpha F \vartheta_{CH}^s \end{aligned}$$

Odvodenie linearizovného dynamického modelu

DMM − MMRS

$$\begin{aligned} V\frac{\mathrm{d}c_A(t)}{\mathrm{d}t} &- V\frac{\mathrm{d}c_A^s}{\mathrm{d}t} + qc_A(t) - qc_A^s + k(t)c_A(t)V - k^s c_A^s V \\ &= qc_{Av}(t) - qc_{Av}^s \\ V\rho c_p \frac{\mathrm{d}\vartheta(t)}{\mathrm{d}t} &- V\rho c_p \frac{\mathrm{d}\vartheta^s}{\mathrm{d}t} + \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta(t) - \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\vartheta^s \\ &+ k(t)c_A(t)V(\Delta_r H) - k^s c_A^s V(\Delta_r H) \\ &= q\rho c_p \vartheta_v(t) - q\rho c_p \vartheta_v^s \\ &+ \alpha F \vartheta_{CH}(t) - \alpha F \vartheta_{CH}^s \end{aligned}$$

Linearizácia: DMM-MM RS

$$\begin{aligned} V\frac{\mathrm{d}\left(c_A(t) - c_A^s\right)}{\mathrm{d}t} &+ q\left(c_A(t) - c_A^s\right) + k(t)c_A(t)V - k^s c_A^s V \\ &= q\left(c_{Av}(t) - c_{Av}^s\right) \\ V\rho c_p \frac{\mathrm{d}\left(\vartheta(t) - \vartheta^s\right)}{\mathrm{d}t} &+ \left[q\rho c_p + \alpha F\right]\left(\vartheta(t) - \vartheta^s\right) \\ &+ k(t)c_A(t)V(\Delta_r H) - k^s c_A^s V(\Delta_r H) \\ &= q\rho c_p\left(\vartheta_v(t) - \vartheta_v^s\right) + \alpha F\left(\vartheta_{CH}(t) - \vartheta_{CH}^s\right) \end{aligned}$$

Linearizácia

Definovanie odchýlkových veličín:
stavových, vstupných, výstupných

$$\begin{aligned} x_1(t) &= c_A(t) - c_A^s & x_2(t) &= \vartheta(t) - \vartheta^s \\ & & u(t) &= \vartheta_{CH}(t) - \vartheta_{CH}^s \\ r_1(t) &= c_{Av}(t) - c_{Av}^s & r_2(t) &= \vartheta_v(t) - \vartheta_v^s \\ & & y(t) &= x_2(t) \end{aligned}$$

Linearizácia

Linearizácia nelineárneho člena

$$
\begin{aligned}
f(x,y)|_{x=x^s,y=y^s} &\approx f(x^s,y^s) + \left.\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right|_{x=x^s,y=y^s}(x-x^s) \\
&+ \left.\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right|_{x=x^s,y=y^s}(y-y^s) \\
k(t)c_A(t) = k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta(t)}} c_A(t) &\approx k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta^s}} c_A^s + k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta^s}} (c_A(t) - c_A^s) \\
&+ k_0 e^{-\frac{E_a}{R\vartheta^s}} c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} (\vartheta(t) - \vartheta^s) \\
&= k^s c_A^s + k^s x_1(t) + k^s c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} x_2(t)
\end{aligned}
$$

Linearizácia

Dosadenie po linearizácii a dosadenie odchýlkových veličín

$$
\begin{aligned}
V\frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} &+ q x_1(t) + k^s c_A^s V + k^s V x_1(t) + k^s c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} V x_2(t) \\
&- k^s c_A^s V = q r_1(t) \\
V\rho c_p \frac{\mathrm{d}x_2(t)}{\mathrm{d}t} &+ \left[q\rho c_p + \alpha F\right] x_2(t) + k^s c_A^s V(\Delta_r H) + k^s V(\Delta_r H) x_1(t) \\
&+ k^s c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} V(\Delta_r H) x_2(t) - k^s c_A^s V(\Delta_r H) \\
&= q\rho c_p r_2(t) + \alpha F u(t)
\end{aligned}
$$

Linearizácia

Matematické úpravy

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} &= -\left(\frac{q}{V} + k^s\right) x_1(t) - k^s c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} x_2(t) \\
&+ \frac{q}{V} r_1(t) \\
\frac{\mathrm{d}x_2(t)}{\mathrm{d}t} &= -\left[\frac{q}{V} + \frac{\alpha F}{V\rho c_p} + \frac{k^s c_A^s (\Delta_r H)}{\rho c_p} \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2}\right] x_2(t) \\
&- \frac{k^s(\Delta_r H)}{\rho c_p} x_1(t) + \frac{q}{V} r_2(t) + \frac{\alpha F}{V\rho c_p} u(t)
\end{aligned}
$$

Linearizácia

Definovanie

$$
\begin{aligned}
a_{11} &= -\left(\frac{q}{V} + k^s\right) \\
a_{12} &= -k^s c_A^s \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2} \\
a_{21} &= -\frac{k^s(\Delta_r H)}{\rho c_p} \\
a_{22} &= -\left[\frac{q}{V} + \frac{\alpha F}{V\rho c_p} + \frac{k^s c_A^s (\Delta_r H)}{\rho c_p} \frac{E_a/R}{(\vartheta^s)^2}\right] \\
b_2 &= \frac{\alpha F}{V\rho c_p}, h_{11} = \frac{q}{V}, h_{22} = \frac{q}{V}
\end{aligned}
$$

Linearizácia

Linearizovaný model

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} &= a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t) + h_{11}r_1(t)\\ \frac{\mathrm{d}x_2(t)}{\mathrm{d}t} &= a_{22}x_2(t) + a_{21}x_1(t) + h_{22}r_2(t) + b_2u(t)\\ y(t) &= x_2(t)\end{aligned}$$

Začiatočné podmienky

$$\begin{aligned}x_1(0) = c_A(0) - c_A^s = c_A^s - c_A^s = 0\\ x_2(0) = \vartheta(0) - \vartheta^s = \vartheta^s - \vartheta^s = 0\end{aligned}$$

Odvodenie prenosu

Pre reaktor kvôli sledovaniu vplyvu ϑ_{CH} na ϑ odvodíme prenos: G_{yu}
Linearizovaný odchýlkový model pre odvodenie G_{yu}

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x_1(t)}{\mathrm{d}t} &= a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t)\\ \frac{\mathrm{d}x_2(t)}{\mathrm{d}t} &= a_{22}x_2(t) + a_{21}x_1(t) + b_2u(t)\\ y(t) &= x_2(t)\end{aligned}$$

Odvodenie prenosu

Laplaceova transformácia

$$\begin{aligned}sX_1(s) = a_{11}X_1(s) + a_{12}X_2(s)\\ sX_2(s) = a_{22}X_2(s) + a_{21}X_1(s) + b_2U_2(s)\\ Y(s) = X_2(s)\end{aligned}$$

Odvodenie prenosu

Matematické úpravy

$$\begin{aligned}X_1(s) = \frac{a_{12}X_2(s)}{s - a_{11}}\\ sX_2(s) - a_{22}X_2(s) = \frac{a_{21}a_{12}X_2(s)}{s - a_{11}} + b_2U_2(s)\\ (s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22})X_2(s) = a_{21}a_{12}X_2(s) + b_2U_2(s)\\ (s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12})X_2(s) = b_2U_2(s)\end{aligned}$$

Odvodenie prenosu

Matematické úpravy

$$X_2(s) = \frac{b_2}{s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}} U_2(s)$$

$$Y(s) = X_2(s) = \frac{b_2}{s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}} U_2(s)$$

$$G_{yu} = \frac{b_2}{s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}}$$

Výpočet odozvy reaktora na zmenu ϑ_{CH}

Zmena: z hodnoty ϑ^s_{CH} na hodnotu $\vartheta^s_{CH} + \Delta\vartheta^s_{CH}$

$$\begin{aligned} u(t) &= \vartheta_{CH}(t) - \vartheta^s_{CH} = \vartheta^s_{CH} + \Delta\vartheta_{CH} - \vartheta^s_{CH} = \Delta\vartheta_{CH} \\ U(s) &= \frac{\Delta\vartheta_{CH}}{s} \end{aligned}$$

Výpočet zmeny teploty reačnej zmesi

$$\begin{aligned} Y(s) &= G_{yu}(s)U(s) = \frac{b_2}{s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}} \frac{\Delta\vartheta_{CH}}{s} \\ y(t) &= \mathcal{L}^{-1}\left\{ \frac{b_2}{s^2 - (a_{11} + a_{22})s + a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}} \frac{\Delta\vartheta_{CH}}{s} \right\} \\ \vartheta(t) &= y(t) + \vartheta^s \end{aligned}$$